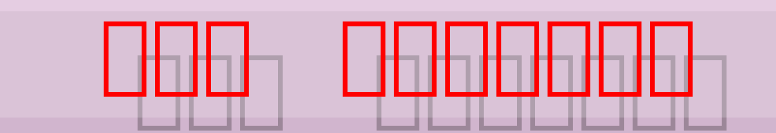
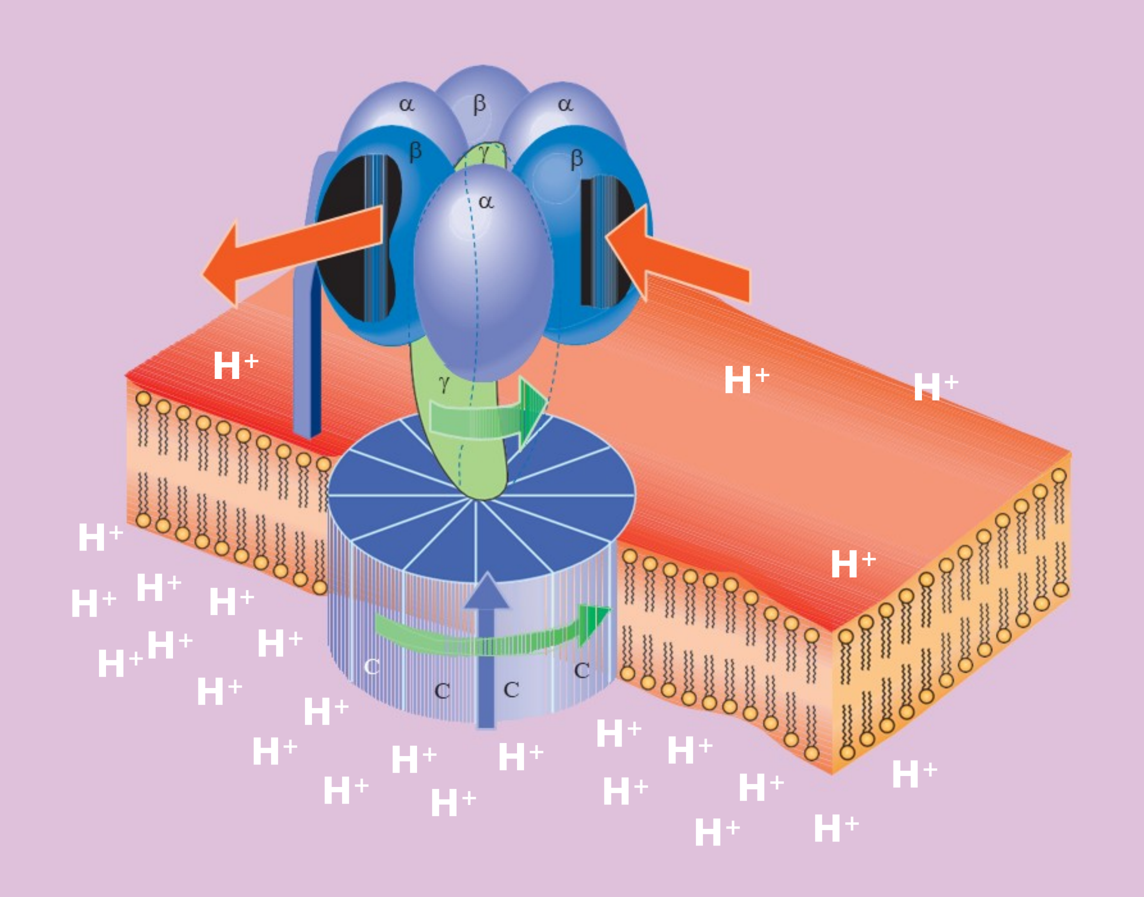
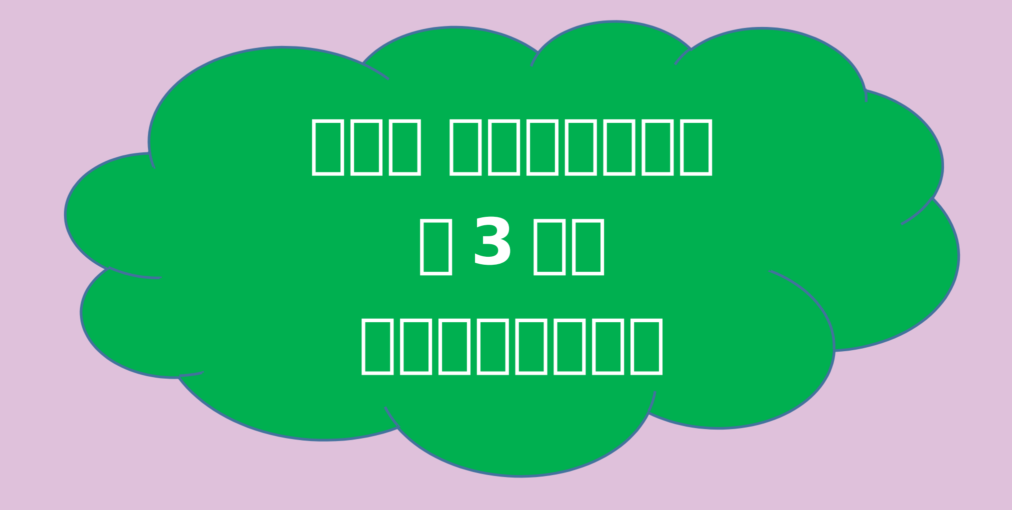
人教版®




α
β
α
β
γ
β
α
γ
c
c
c
c
H^+

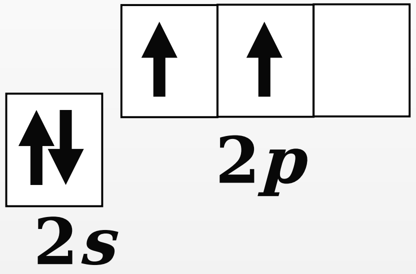

3

【思考与讨论】

（1）$BeCl_2$ 中 Be 原子价电子排布为 $2s^2$，最外层只有 2 个已成对电子，为什么能和 2 个氯原子成键且形成直线形结构呢?

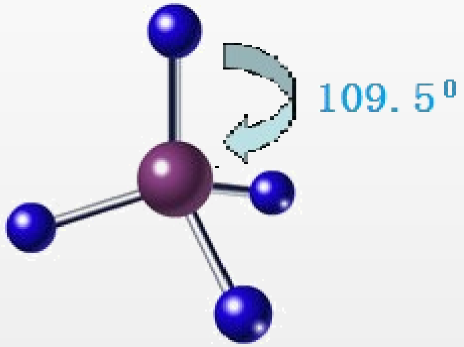
（2）写出碳原子的核外电子排布图，思考为什么碳原子与氢原子结合不是形成 CH_2，而是形成 CH_4？

C 原子的价电子 → 共价键的饱和性 → CH_2 → 共价键的方向性 → **90°**



甲烷

CH_4



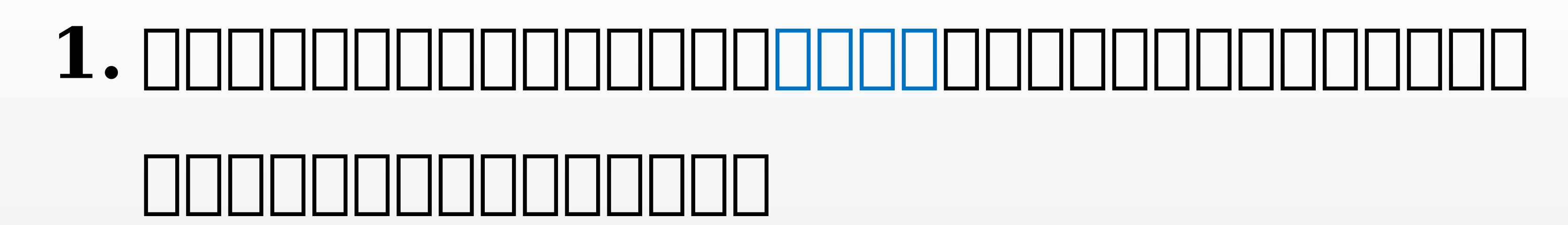
按照我们已经学过的价键理论，甲烷的 **4** 个 **C — H** 单键都应该是 **σ** 键，然而，碳原子的 **4** 个价层原子轨道是 **3** 个相互垂直的 **2p** 轨道和 **1** 个球形的 **2s** 轨道，用它们跟 **4** 个氢原子的 **1s** 原子轨道重叠，不可能得到正四面体构型的甲烷分子。

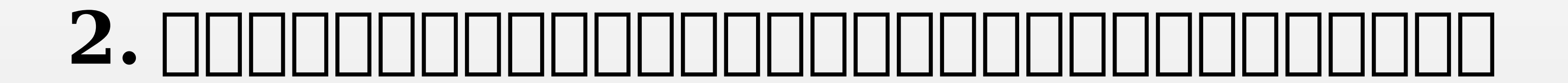
为了解决这些矛盾，鲍林提出了杂化轨道理论。

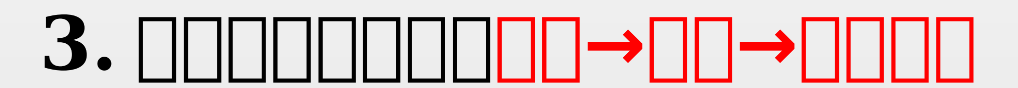
杂化轨道理论是一种价键理论，是鲍林为了解释分子的空间结构提出的。

四、杂化理论简介
1.轨道的杂化：在外界条件影响下，中心原子能量相近的原子轨道发生混杂，重新组合成一组新的轨道的过程。
2.杂化轨道：原子轨道杂化后形成的一组新的原子轨道，叫做杂化轨道。 3.轨道杂化的过程：激发→杂化→轨道重叠

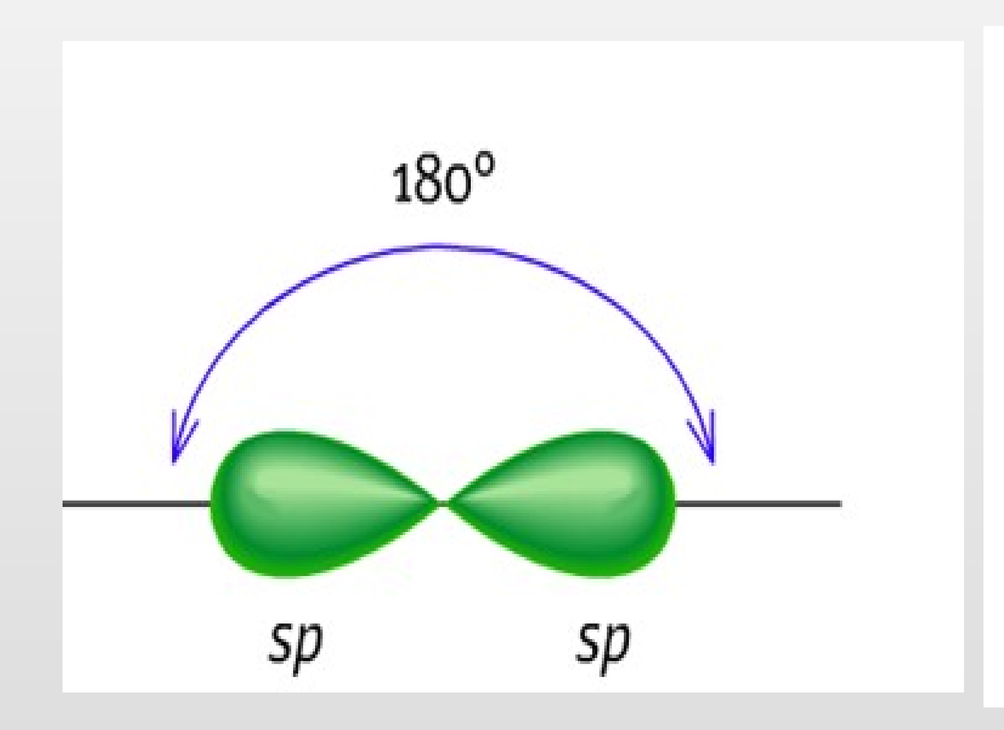
4.要点：
（1）参与杂化的原子轨道能量相近（同一能级组或相近能级组的轨道）（2）杂化前后轨道数目不变，新形成的几个杂化轨道能量相同。

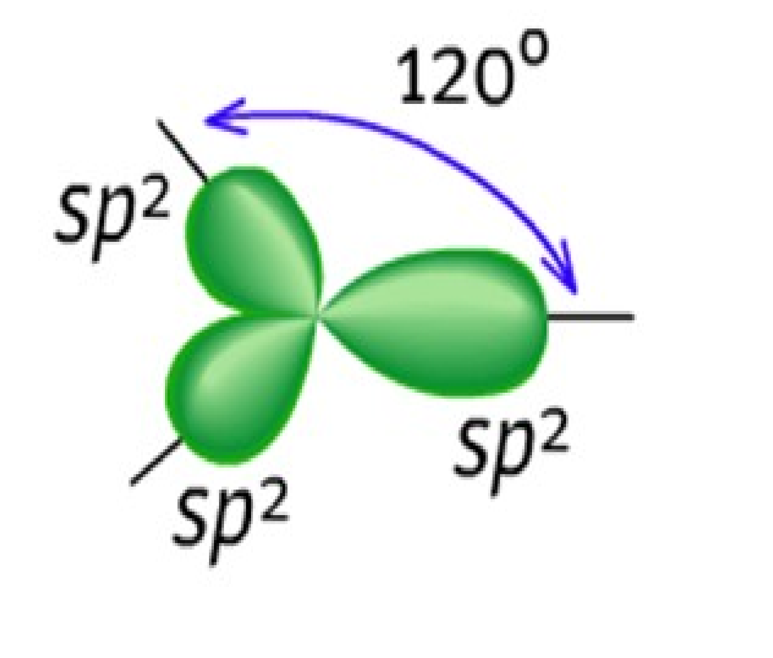


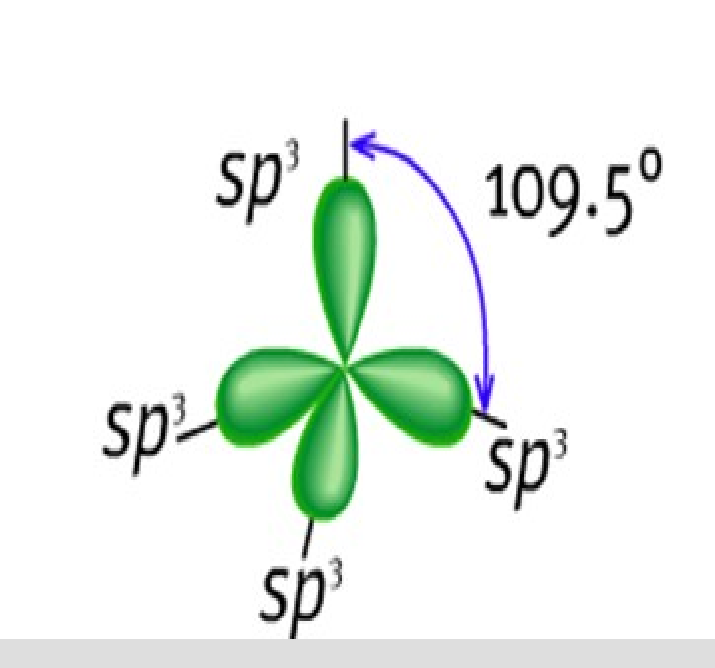




（3）杂化轨道的形状发生了变化，更有利于有效地重叠，成键能力更强。（4）杂化轨道的伸展方向发生变化，杂化后原子轨道在空间取最大夹角分布，能使相互间排斥力最小。







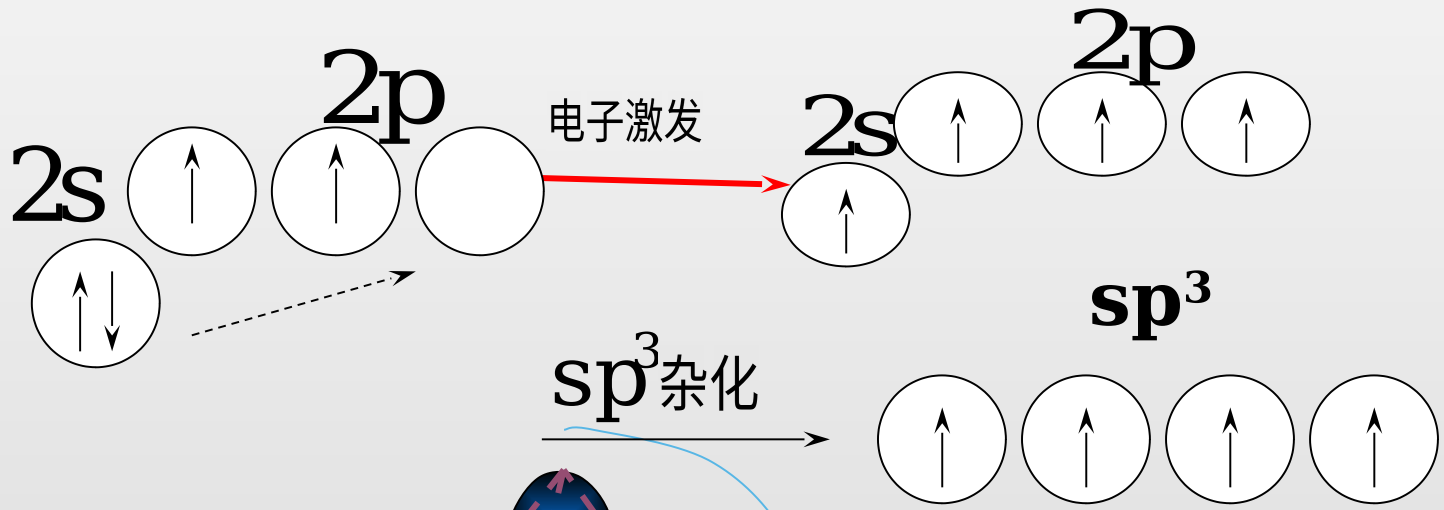
8. 杂化类型及分子的空间构型

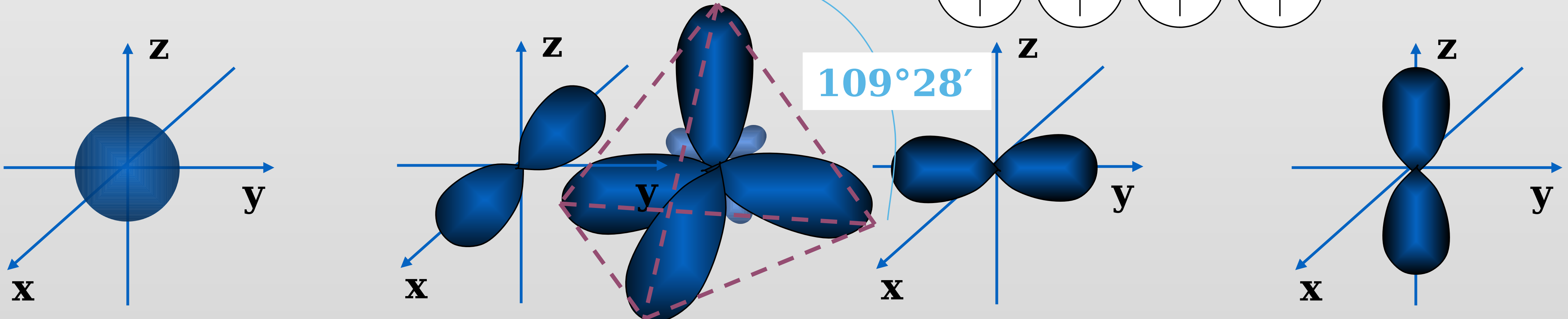
（1）sp^3 杂化

由 1 个 s 轨道和 3 个 p 轨道混杂并重新组合成 4 个能量与形状完全相同的轨道。我们把这种轨道称之为 sp^3 杂化轨道。

例如：CH_4 分子

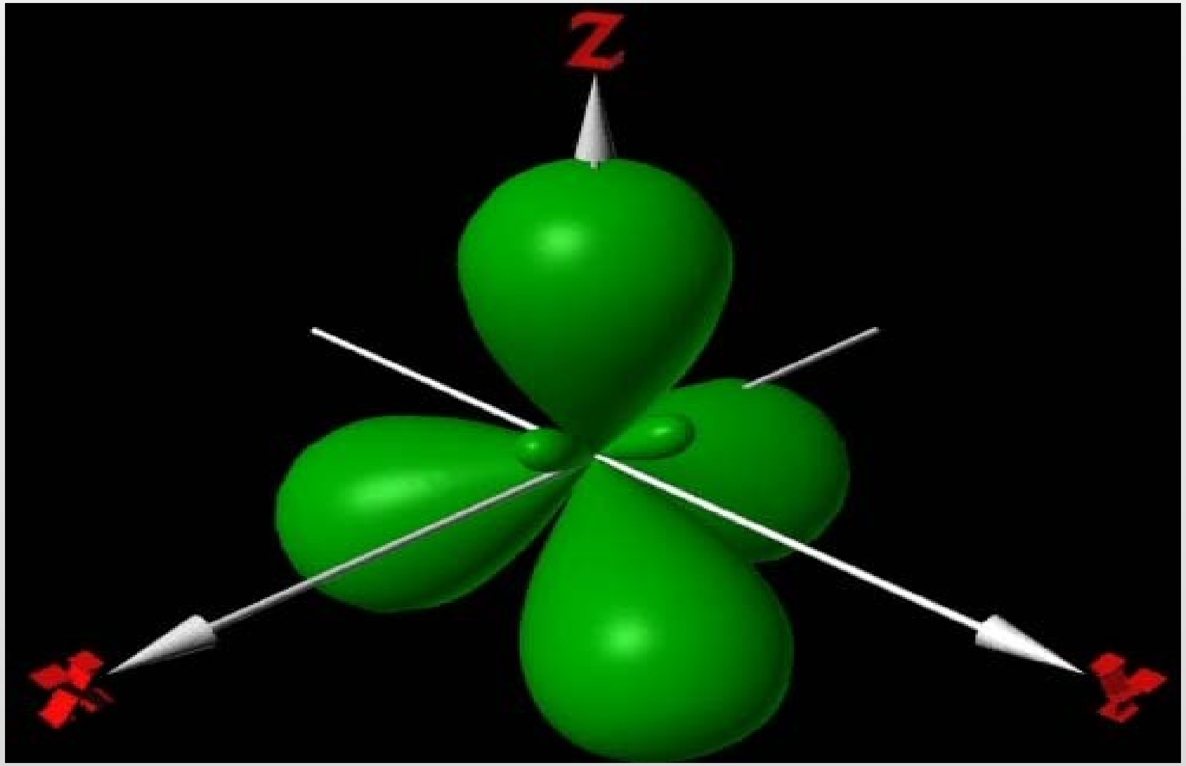
C：$2s^22p^2$

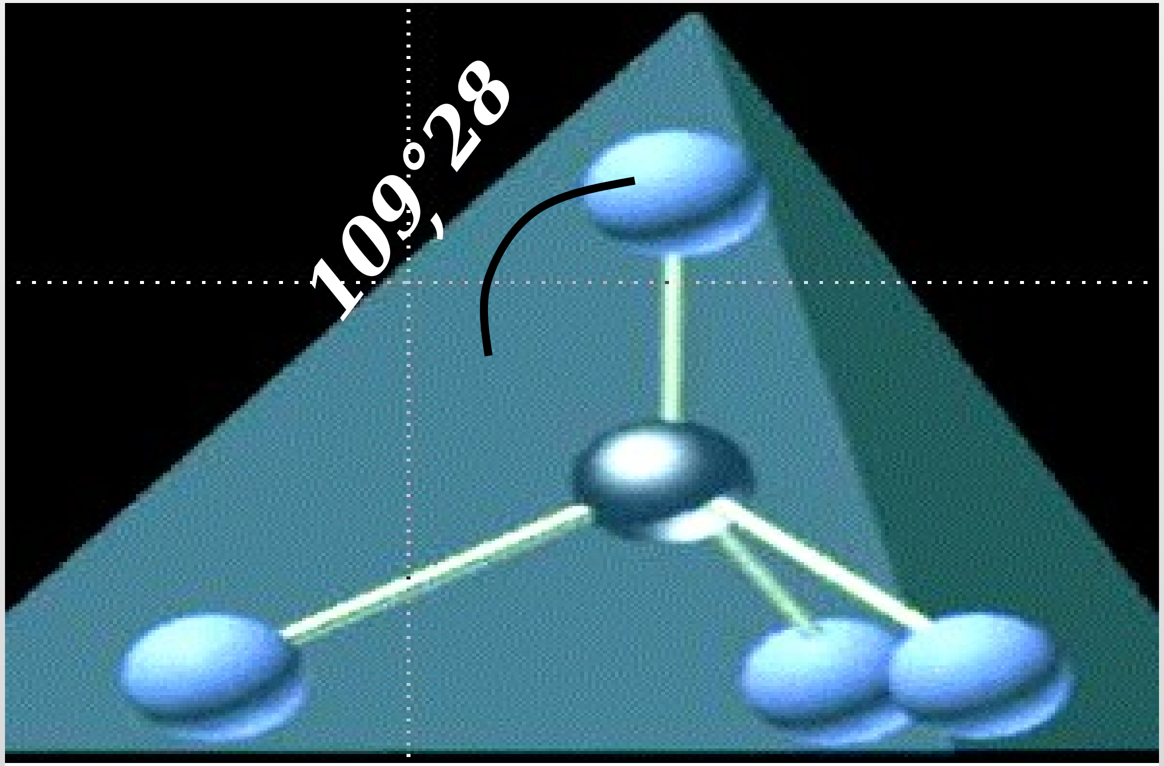




为了四个杂化轨道在空间尽可能远离，使轨道间的排斥最小， **4** 个杂化轨道的伸展方向成什么立体构型 **?**

四个 **H** 原子分别以 **4** 个 **s** 轨道与 **C** 原子上的四个 **sp^3** 杂化轨道相互重叠后，就形成了四个性质、能量和键角都完全相同的 **$S\text{-}SP^3\sigma$** 键，从而构成一个正四面体形的分子。





思考：水分子和氨分子中的中心原子是否也是采取 sp^3 杂化？

价层电子对互斥模型

↓

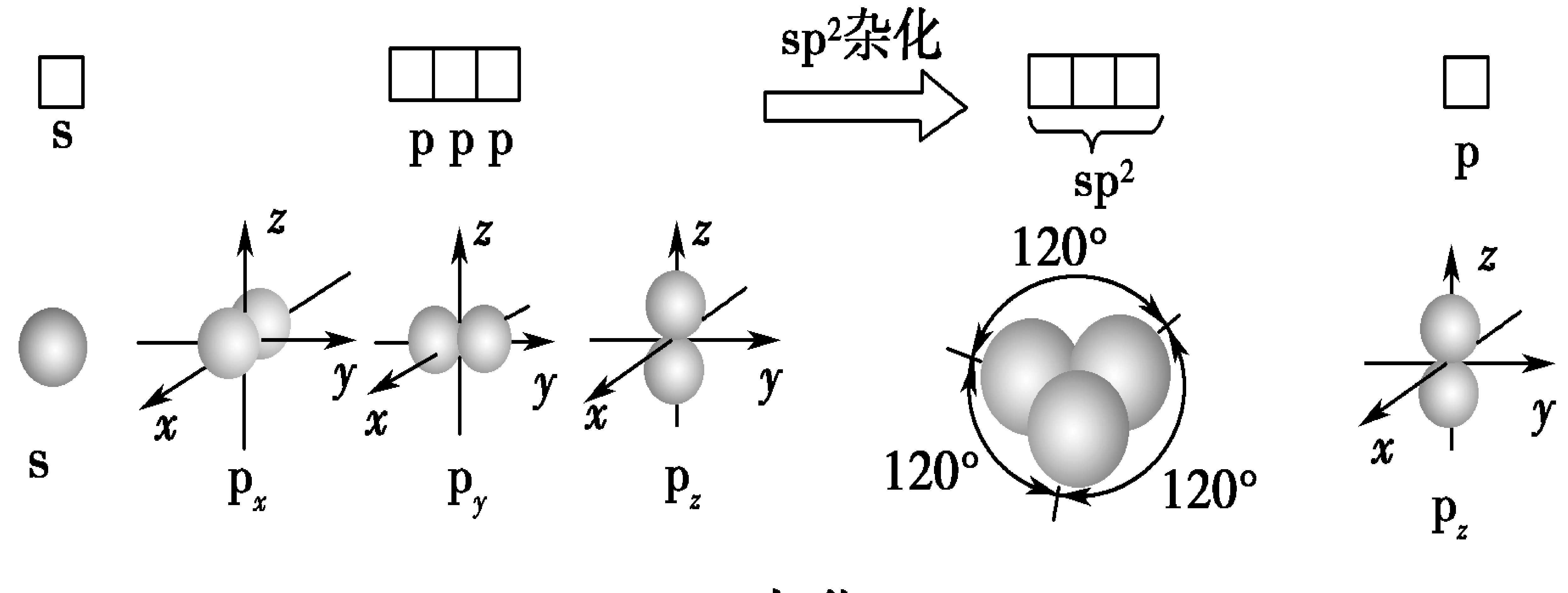
H_2O 和 NH_3 的 VSEPR 模型与 CH_4 一样，四面体形

↓

H_2O 和 NH_3 的中心原子采取 sp^3 的杂化

H_2O	NH_3
2 个杂化轨道被 σ 电子对占据	3 个杂化轨道被 σ 电子对占据
2 个杂化轨道被孤电子对占据	1 个杂化轨道被孤电子对占据

杂化轨道用于构建分子的 σ 轨道和孤电子对轨道



sp²杂化

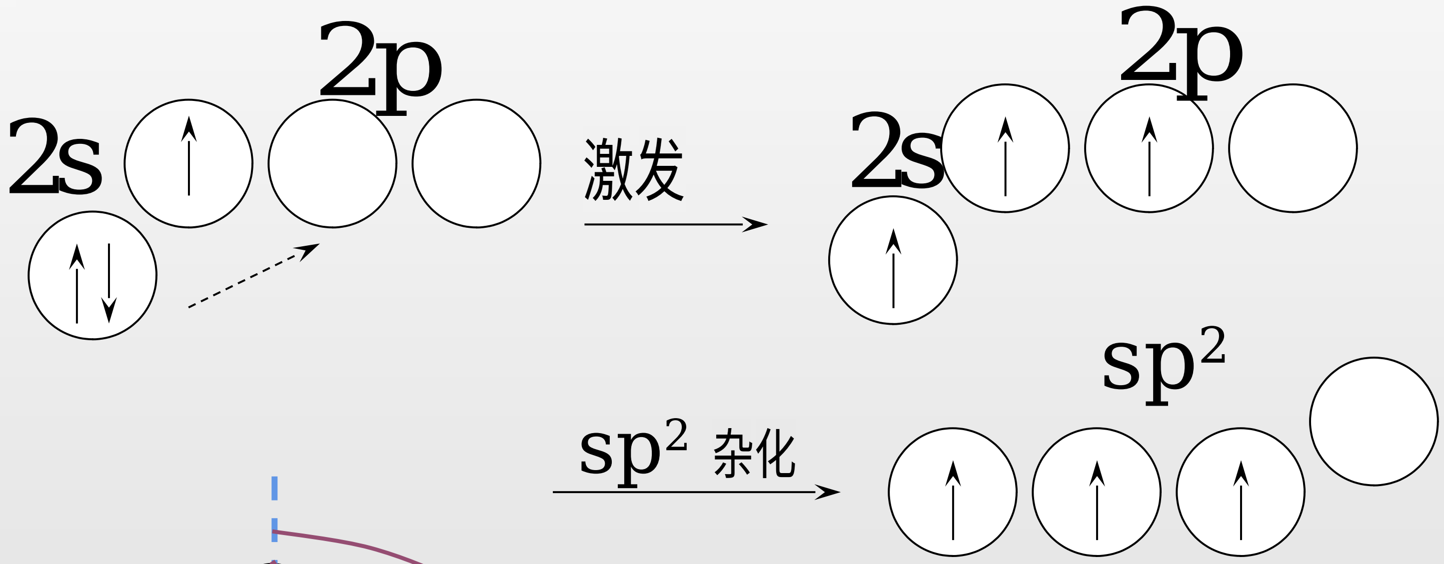
2.sp^2 杂化

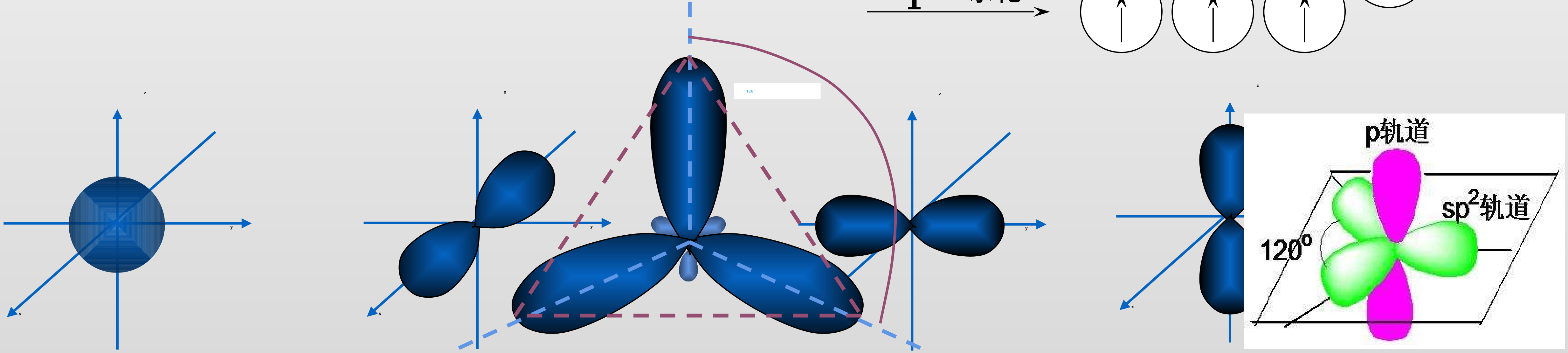
一个 **s** 轨道与两个 **p** 轨道杂化，得三个 **sp^2** 杂化轨道，三个杂化轨道在空间分布是在同一平面上，互成 **120º,** 呈平面三角形。如 **SO_2** ，**BF_3**

例如: **BF_3** 分子:

B ： **$1s^22s^22p^1$**

没有 **3** 个单电子





3.sp 杂化

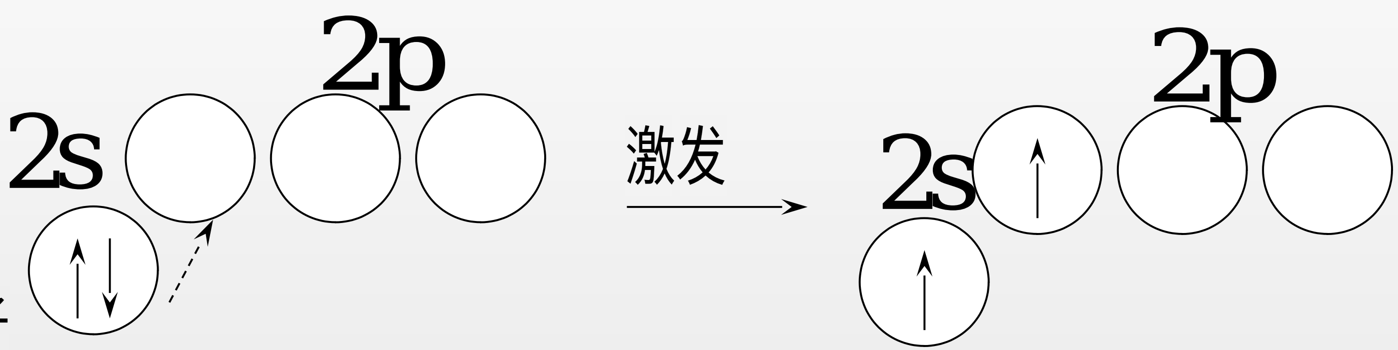
一个 **s** 轨道与一个 **p** 轨道杂化后，得两个 **sp** 杂化轨道，杂化轨道之间的夹角为 **180** 度。 **CO_2**

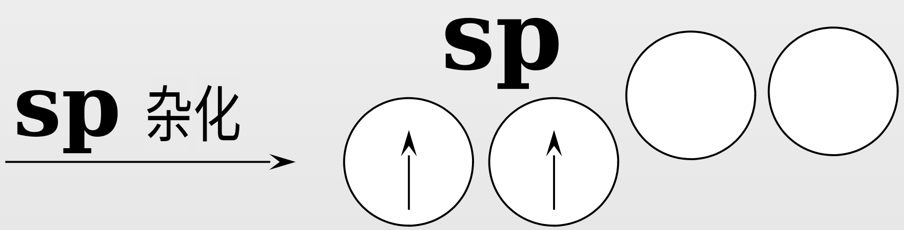
$BeCl_2$

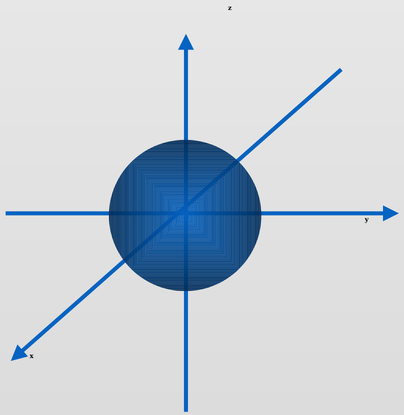
例如 **$BeCl_2$** 分子

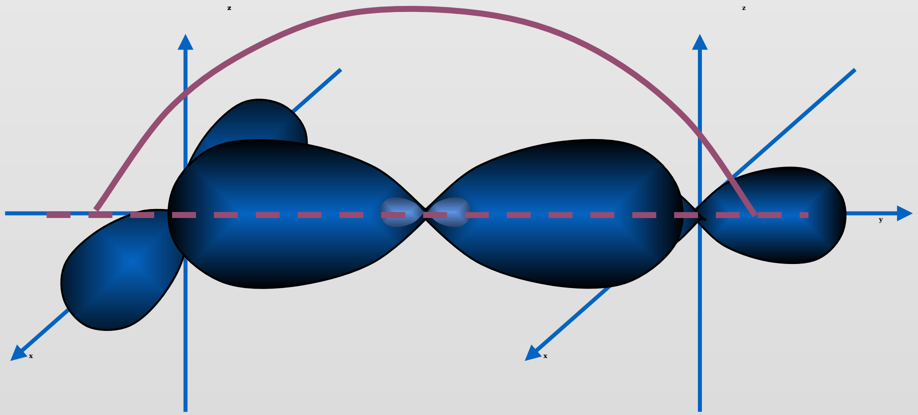
Be $1s^2 2s^2$

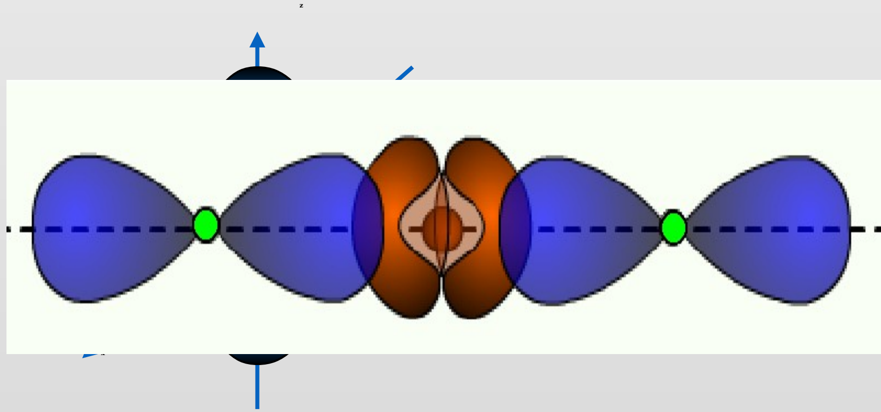
没有单电子











点拨： sp 、sp^2 两种杂化形式中还有未参与杂化的 p 轨道，可用于形成 π 键，而杂化轨道只用于形成 σ 键或者用来容纳未参与成键的孤电子对。

【提出问题】如何判断杂化类型呢?

方法一：利用杂化轨道数判断

化学式	$BeCl_2$	SO_2	CO_3^{2-}	CH_4	NH_4^+	NH_3	H_2O
σ 键电子对	2	2	3	4	4	3	2
孤电子对	0	1	0	0	0	1	2
中心原子价层电子对数	2	3	3	4	4	4	4
杂化轨道数	2	3	3	4	4	4	4
VSEPR 模型	直线	平面三角形	平面三角形	四面体形	□面体形	四面体形	四面体形
杂化类型	sp	sp^2	sp^2	sp^3	sp^3	sp^3	sp^3

练习 3 、推测下列微粒中心原子的杂化类型

化学式	H_3O^+	NH_2^-	CO_2	$CHCl_3$	$COCl_2$	PCl_3
σ 键电子对	3	2	2	4	3	3
孤电子对	1	2	0	0	0	1
杂化类型	sp^3	sp^3	sp	sp^3	sp^2	sp^3

杂化的条件：

(1) 只有在形成化学键时才能杂化

(2) 只有能量相近的轨道间才能杂化

杂化轨道的特征：

(1) 杂化前后轨道数不变

(2) 杂化过程中轨道的形状发生变化

(3) 杂化后形成的化学键更稳定

(4) 杂化后的新轨道能量、形状都相同

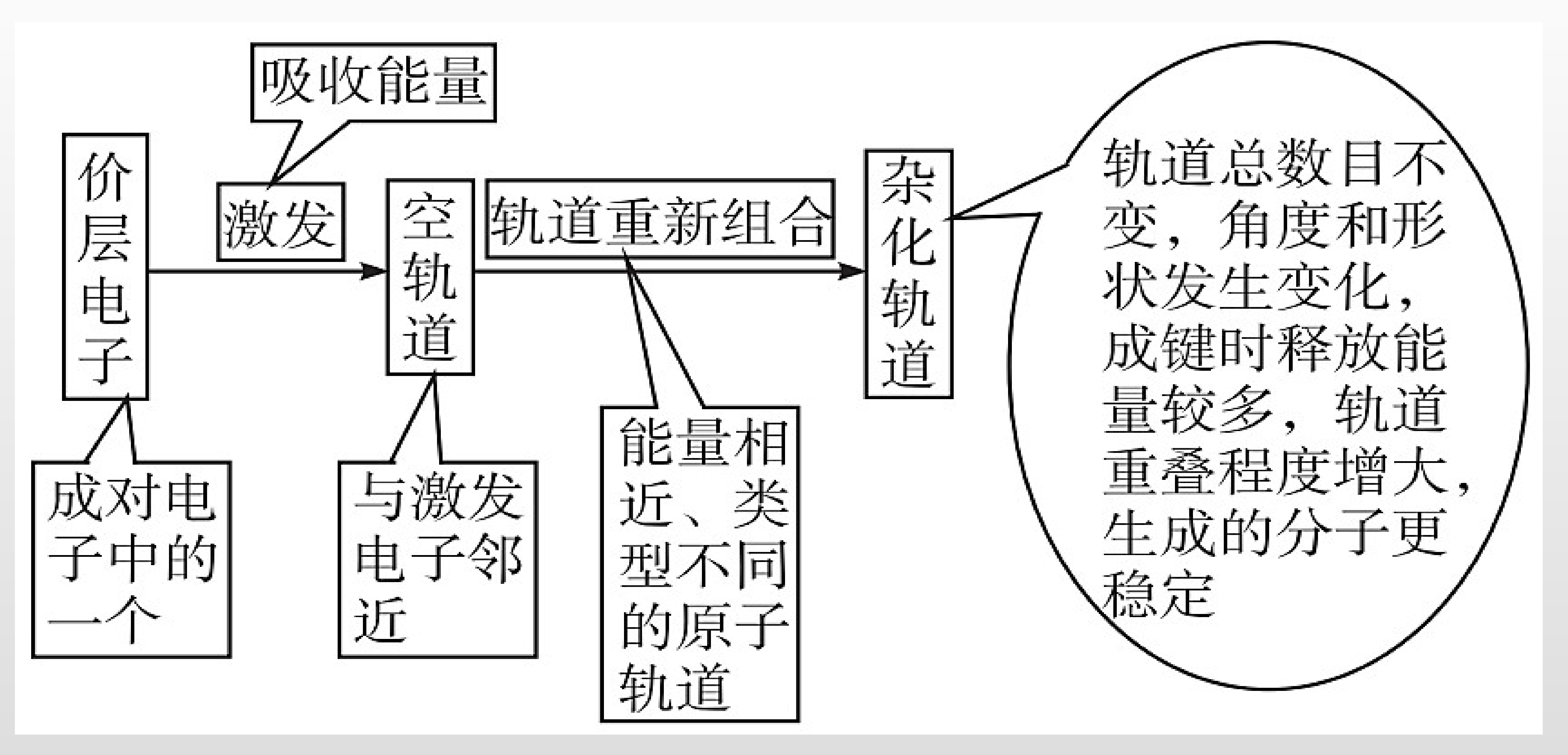
(5) 杂化后的轨道之间尽可能远离（在空间取最大夹角分布）。

(6) 杂化轨道只用于形成 **σ** 键和容纳孤电子对，未参与杂化的 **p** 轨道可用于形成 **π** 键。

（**7**）杂化轨道数 = 中心原子上的孤电子对数 + 与中心原子结合的原子数。

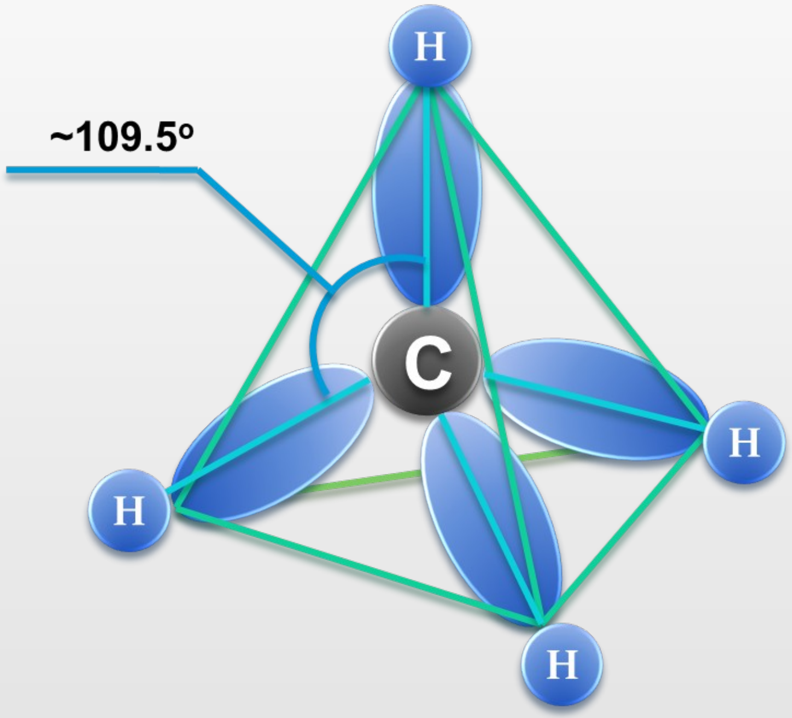
[illegible]子的空间结构主要取决于原[illegible]轨道的杂化类型。

7 [illegible]


吸收能量
价层电子
激发
空轨道
轨道重新组合
杂化轨道
轨道总数目不变，角度和形状发生变化，成键时释放能量较多，轨道重叠程度增大，生成的分子更稳定
成对电子中的一个
与激发电子邻近
能量相近、类型不同的原子轨道

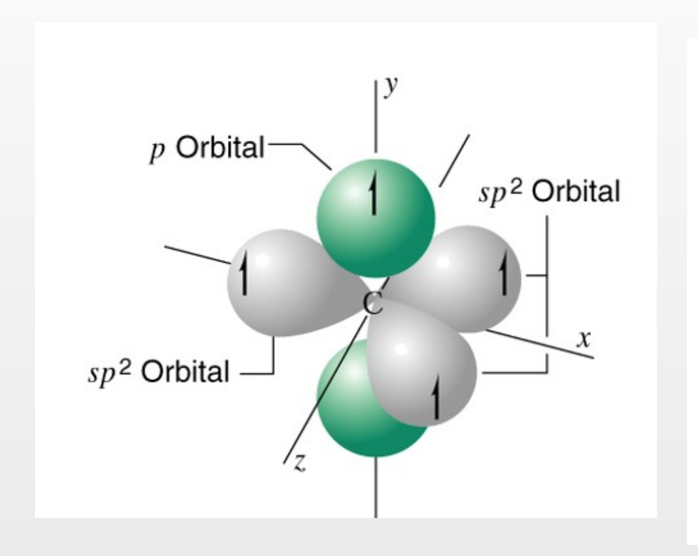
方法二：有机物中碳原子杂化轨道类型判断

1、甲烷

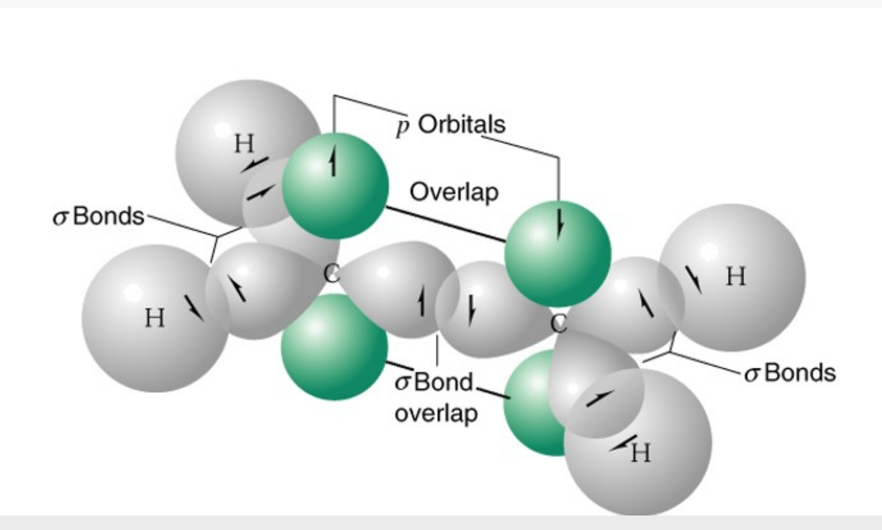


甲烷中的碳原子为饱和碳原子，碳原子是 **sp^3** 杂化

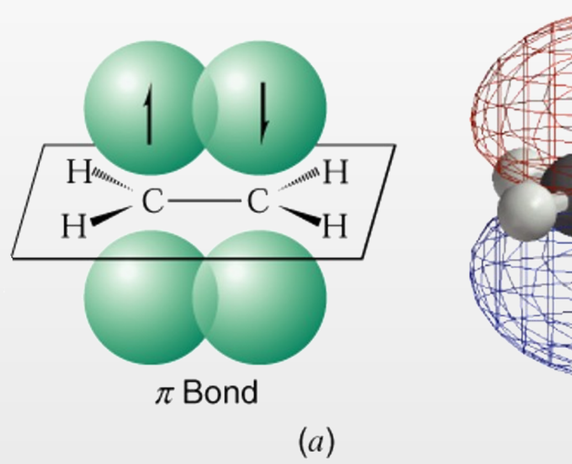
2 □□□



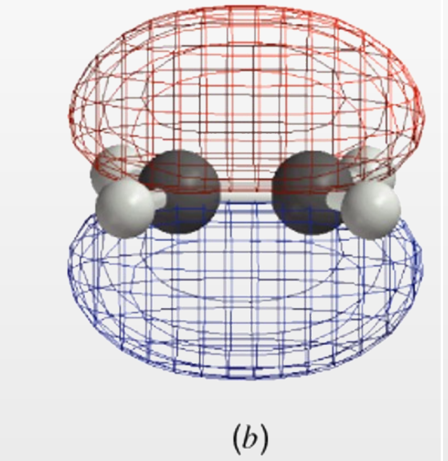
y
p Orbital
sp² Orbital
C
x
sp² Orbital
z



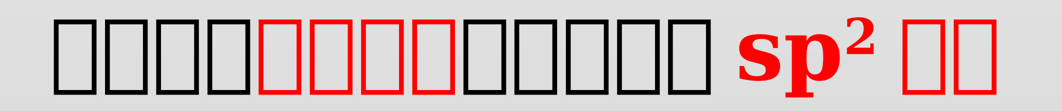
p Orbitals
Overlap
σ Bonds
H
C
σ Bond overlap
σ Bonds



H
C
C
H
π Bond
(a)



(b)



H
C
~121°
~118°

□□□□□□□□□□□□□ sp^2 □□

□□ 1 □□□ C_2H_4 □□□□□

□□□□□

C $2s^2$ $2p^2$

H $1s^1$

□□□□□□

C $2s^1$ $2p^3$

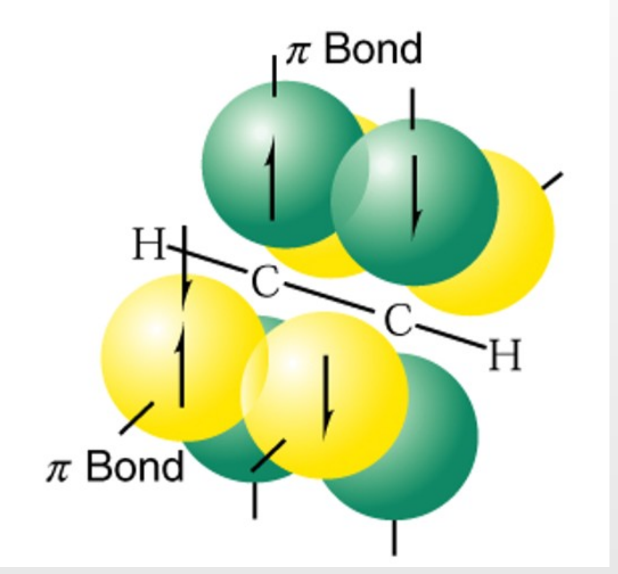
□□□□

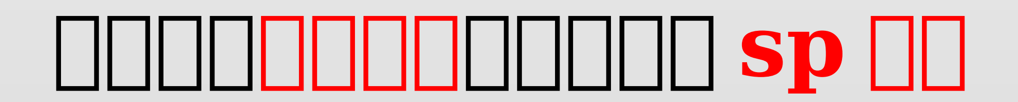
H H H H

3

p Orbitals
sp Orbital
C
sp Orbital

π Bond
σ Bond
H
C
C
H
π Bond





□□2□□□CH ≡CH□□□□□

□□□□□

C $2s^2$ ↑↓ $2p^2$ ↑ ↑

H $1s^1$ ↑

□□□□□□

C $2s^1$ ↑ $2p^3$ ↑ ↑ ↑

□□□□

【总结】有机物中碳原子杂化类型的判断

饱和碳原子采取 sp^3 杂化，连接双键的碳原子采取 sp^2 杂化，连接三键的碳原子采取 sp 杂化

● 注意：杂化轨道只能容纳 σ 键电子对和孤电子对。未参与杂化的 p 轨道用于形成 π 键！

□□ 4 □□□□□□□□□□□□□□□□

sp^3 sp^3 sp^3

(1) $CH_3CH_2CH_3$

sp^3 sp^2 sp^2

(2) $CH_3CH=CH_2$

sp s sp^2 sp^2

p

(3) $CH\equiv CCH=CH_2$

方法三：根据杂化轨道之间的夹角判断

夹角为 109°28′ → sp^3 杂化

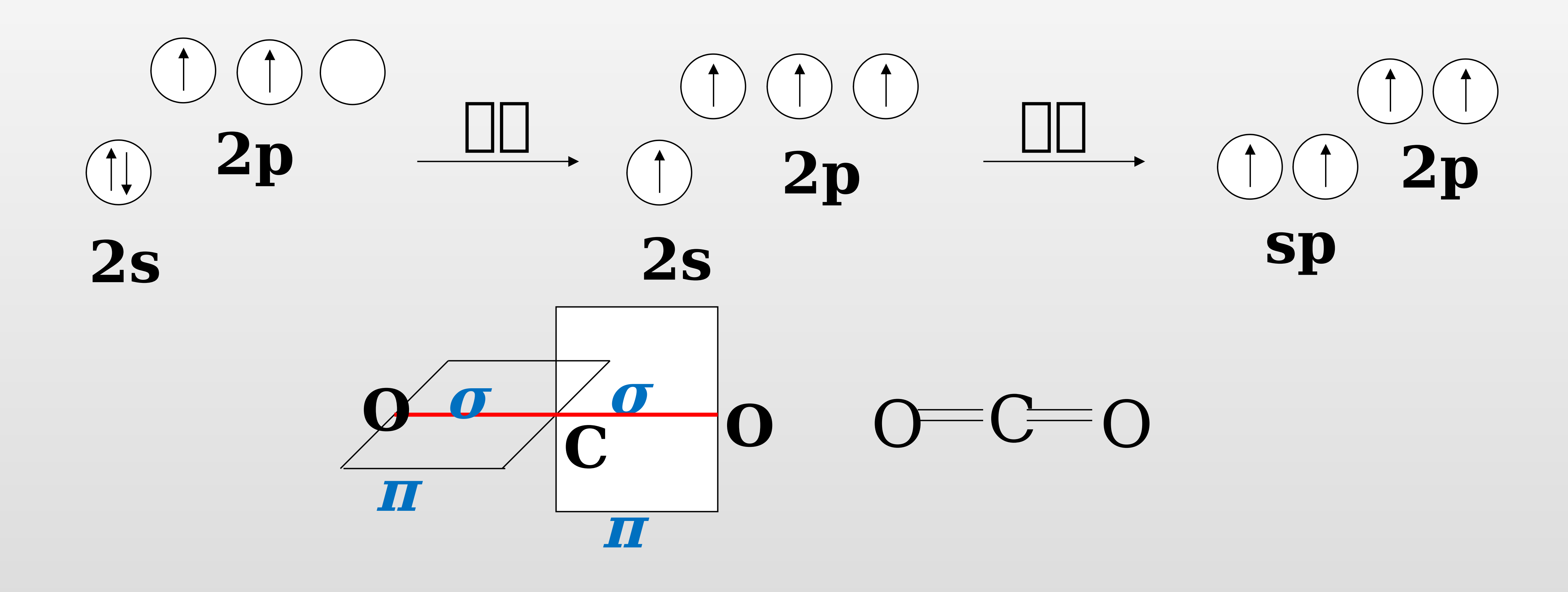
夹角为 120° → sp^2 杂化

夹角为 180° → sp 杂化

CO_2 □□□□□□□ 180 □

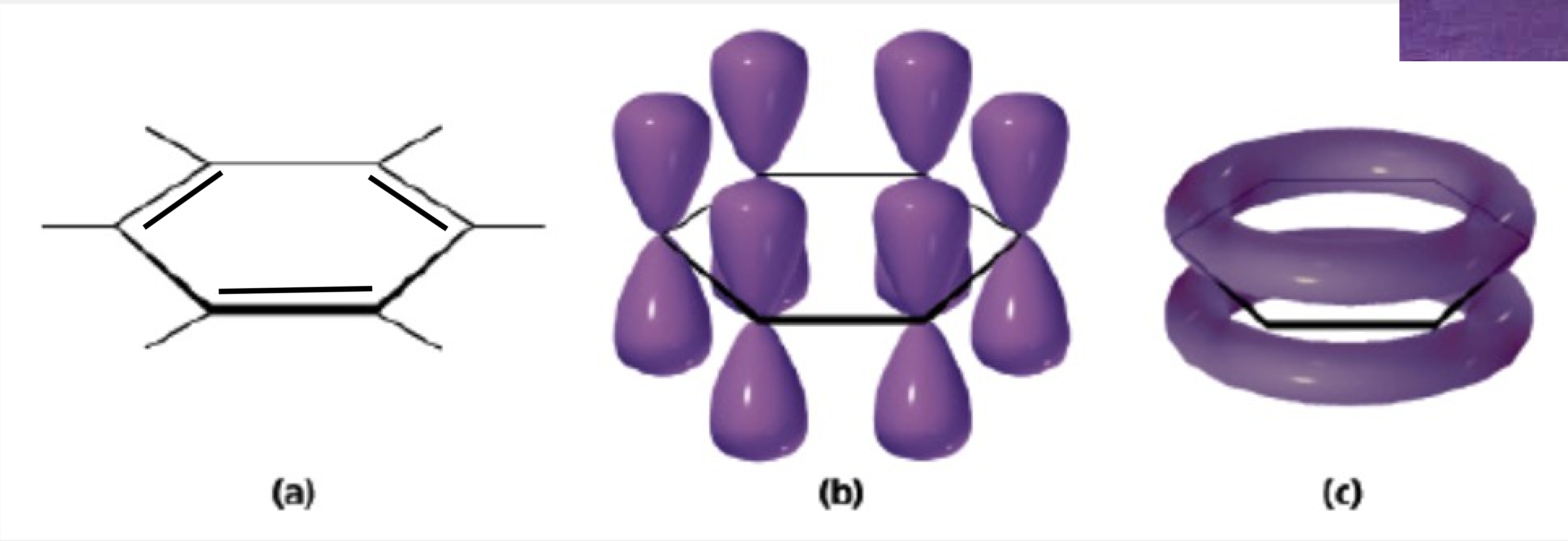
C $2s^2 2p^2$

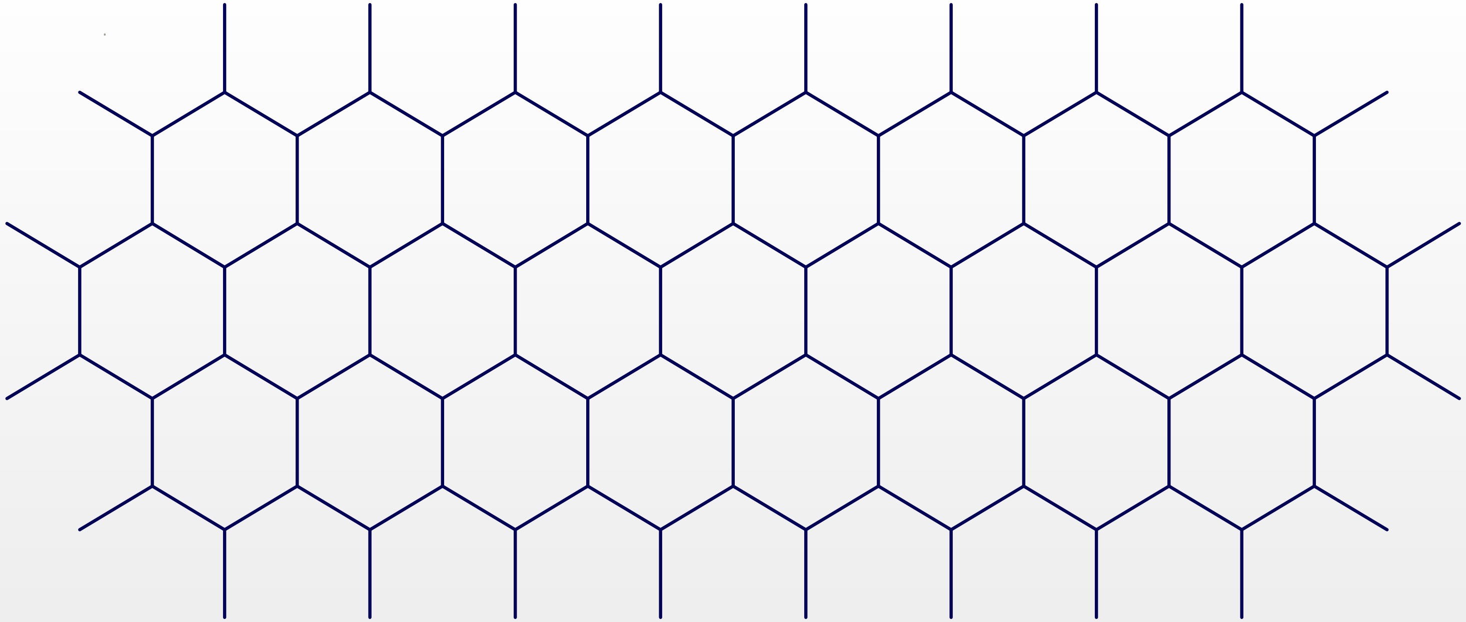
O $2s^2 2p_x^1 2p_z^1 2p_y^2$

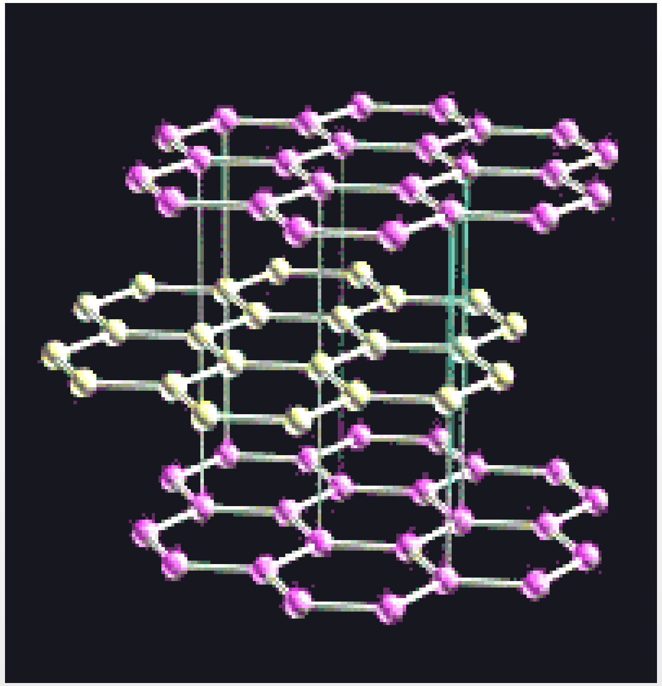


C_6H_6 □□□□□□□□ 120 □

C □ sp^2 □□□ 3 □□□□□□□ 120° □ □







石墨分子结构是层形结构，每层是由无限个碳六元环所形成的平面，碳原子取 sp^2 杂化，每个碳原子尚余一个未参与杂化的 p 轨道，垂直于分子平面而相互平行。

平行的 n 个 p 轨道形成了一个 p-p 大键。电子在这个大键中可以自由移动，所以石墨能导电。

[illegible]

[illegible]	[illegible]	VSEPR [illegible]	[illegible]	[illegible]	[illegible]
2	sp	[illegible]	0	[illegible]	$BeCl_2$[illegible]CO_2
3	sp^2	[illegible]	0	V[illegible]	SO_2
3	sp^2		1	[illegible]	SO_3
4	sp^3	[illegible]	0	V[illegible]	H_2O
4	sp^3		1	[illegible]	NH_3
4	sp^3		2	[illegible]	CH_4[illegible]CCl_4

练习 1 、甲醛 ($H_2C=O$) 在 Ni 催化作用下加氢可得甲醇 (CH_3OH) 。甲醇分子内 C 原子的杂化

sp^3 □□ 小□

方式为________________，甲醇分□□的 O-C-H 键角 ______(填“大于”“等于”或“小于”) 甲醛分子内的 O-C-H 键角。

练习 2 、Sn 为ⅣA 族元素，单质 Sn 与干燥 Cl_2 反应生成 $SnCl_4$ 。常温常压下 $SnCl_4$ 为无色液体

正四面体形

，$SnCl_4$ 空间构型为 ________________

练习 3 、在 BrCH=CHBr 分子中 ,C—Br 键采用的成键轨道是 ( ) C

A.sp-p　　B.sp^2-s　　C.sp^2-p　　D.sp^3-p

解析：分子中的两个碳原子都是采取 sp^2 杂化，溴原子的价电子排布式为 $4s^24p^5$,4p 轨道上的一个未成对电子与碳原子的一个 sp^2 杂化轨道成键。

练习 4 、根据价层电子对互斥模型及原子杂化轨道理论判断 NF_3 分子的空间结构和中心原子的杂化方式为 (　　)　D

A. 直线形　sp 杂化　　B. 平面三角形　sp^2 杂化

C. 三角锥形　sp^2 杂化　　D. 三角锥形　sp^3 杂化